

Title	Quantum Field Theory of Thermal Diffusion
Author(s)	江沢, 洋; 中村, 孔一; 渡辺, 敬二
Citation	物性研究 (1988), 51(2): 243-250
Issue Date	1988-11-20
URL	http://hdl.handle.net/2433/93494
Right	
Type	Departmental Bulletin Paper
Textversion	publisher

7. 以上のように、原子核においても「進化の力学」という立場は極めて重要な観点であり、集団運動の従う力学を、その分化・発生から成長・進化を通じ消滅・散逸していく動力学的機構として捉えられる状況が明確になりつつあると云えよう。しかもこのような統一的理解を可能としているのは、原子核が有限な系であるという事が重要であるように思われる。

Quantum Field Theory of Thermal Diffusion

学習院大学 江 沢 洋
 明治大学 中 村 孔 一
 明星大学 渡 辺 敬 二

1. はじめに

温度が不均一な系の非可逆過程すなわち熱伝導や熱拡散の問題を場の理論に基づいて扱うことが我々の目的である。これらの非可逆過程は今まで多くの人々により論じられたが、それは master equation とか Boltzmann 方程式によるものであり場の理論を出発点とする理論はまだ完成されていない。

系の温度の不均一さは初期条件として次のようにして導入される。¹⁾ はじめに系は均一な温度 T_0 にあると仮定し、ある時刻 $t = -T$ において温度を $\beta_0 = 1/kT_0 \rightarrow \beta_0 + \beta_a(X)$ と変化させる。ここで $\beta_a(X)$ は場所の関数で $|\beta_a(X)| \ll \beta_0$ とする。系の化学ポテンシャル μ は温度が不均一になった直後も場所によらない一定値にしておく。この初期条件を与えて系を放置したとき拡散流や熱流が時間の関数としてどのように変化するかを調べる。

ここでは thermo field dynamics を温度勾配のあるボース粒子からなる系に適用することにより熱拡散の問題を考える。まず時刻 $t = -T$ 以前には粒子間の相互作用がないと仮定し thermal state を構成する。時刻 $t = -T$ に相互作用を入れ $t = T$ に切ることとする。current を $J_\mu(x)$ とするとその平均値 $\langle J_\mu(x) \rangle$ は不均一な温度の系に対し 0 と異なる値をもつ。Zubarev は一種類の粒子のみからなる系に対しては熱拡散がないことを示しているが、²⁾ 我々の初期条件は彼の条件とは異っており熱拡散流が実際に存在し得ることに注意しておく必要がある。

Sec. 2 では thermo field dynamics による $\langle J_\mu(x) \rangle$ の表式を与える。相互作用表示を Sec. 3 に導入し、Gell-Mann Low の方法を用いることにより $\langle J_\mu(x) \rangle$ が Feynman diagram により計算されることを示す。Sec. 4 では相互作用のあるボース粒子の系に対し一体 Green 関数, self energy, 補正されたポテンシャルの Dyson 方程式を導きその近似解を構成する。 $\langle J_\mu(x) \rangle$ が拡散方程式を満たすことを Sec. 5 で示す。

2. Thermo field dynamics

Thermal state $|\beta\rangle$ ($\beta=1/kT$, T は系の温度)はthermal vacuum $|0\rangle \otimes |0\rangle$ に演算子を作用させることにより構成することができる:

$$|\beta\rangle = \exp[iB(\beta)]|0\rangle \otimes |0\rangle \quad (2.1)$$

ここで $B(\beta)$ はthermal doublet $\Phi(x) = \begin{pmatrix} \phi_1(x) \\ \phi_2(x) \end{pmatrix}$ を用いて次式により表わされる:

$$B(\beta) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int \Phi^\dagger(X + \frac{3}{2}) \tau_2 \Phi(X - \frac{3}{2}) \theta(\vec{\xi}, \beta) d^3\xi d^3X \quad (2.2)$$

$X = (\vec{X}, -T)$, $\xi = (\vec{\xi}, 0)$ また τ_2 はPauli行列の第二成分である。 θ はBogoliubovの角度に対応し, そのFourier変換 $\theta(k, \beta)$ は分布関数を用いて表わされる。

$$\sinh^2 \theta(k, \beta) = 1/(e^{\beta\omega_k} - 1) \quad (2.3)$$

$\omega_k = \frac{k^2}{2m} - \mu$, μ は系の化学ポテンシャルである。系の温度を $\beta_0 \rightarrow \beta_0 + \beta_a(X)$ と変化させると θ は

$$\theta(\xi, \beta) \rightarrow \theta(\xi, \beta + \beta_a(X)) = \theta(\xi, \beta) + \frac{\partial \theta}{\partial \beta} \beta_a(X)$$

となる。(2.2)で与えられた B が変化するのでthermal state $|\beta\rangle$ は次のようになる:

$$|\beta + \beta_a\rangle = (1 - i\Gamma[\beta_a, -T])|\beta\rangle \quad (2.4)$$

ここで Γ は

$$\Gamma[\beta_a, -T] = \int \Phi^\dagger(X + \frac{\xi}{2}, -T) \tau_2 \Phi(X - \frac{\xi}{2}, -T) g(\xi, \beta) \beta_a(X) d^3\xi d^3X \quad (2.5)$$

で与えられる。また $g = -\frac{\partial \theta}{\partial \beta}$ である。

Thermo field dynamicsにおいてはthermal stateは自由場で構成されるので相互作用は時刻 $-T$ 以後に入れる必要がある。ここでは $t = -T$ で粒子間の相互作用を入れ $t = T$ で切ることにする。

Current $J_\mu(x)$ の期待値を計算しその時間依存性を調べる。

3. 相互作用表示

Thermo field dynamicsでは系のHamiltonianはthermal doublet ϕ_k ($k=1, 2$)で書かれる。すなわち

$$\mathcal{H} = \sum_{k=1}^2 \epsilon_k \int H(\phi_k(x)) d^3x, \quad \epsilon_k = (-1)^{k-1}. \quad (3.1)$$

相互作用表示を導入するために \mathcal{H} を自由Hamiltonian \mathcal{H}_0 と相互作用Hamiltonian \mathcal{H}' に分離して

$\mathcal{K} = \mathcal{K}_0 + \lambda \mathcal{K}'$ と書く。Heisenberg 表示の current $J_\mu(x)$ は unitary 変換により相互作用表示の current $J_\mu(x)$ と次式により関連づけられる：

$$J_\mu(x) = U^\dagger(t, -T) J_\mu(x) U(t, -T) \quad (3.2)$$

U は

$$i \frac{dU}{dt} = \lambda \mathcal{K}'(t) U \quad (3.3)$$

の解で初期条件 $U(-T, -T) = I$ を満すものである。(2.4) を用いると $\langle J_\mu(x) \rangle$ は次のようになる。

$$\begin{aligned} \langle J_\mu(x) \rangle &= \langle \beta + \beta_a | J_\mu(x, t) | \beta + \beta_a \rangle \\ &= 2 \operatorname{Im} \{ \langle \beta | U^\dagger(t, -T) J_\mu(\vec{x}, t) U(t_1 - T) \Gamma[\beta_a, -T] | \beta \rangle \} + O(\beta_a^2) \end{aligned} \quad (3.4)$$

ここで $\langle \beta | U^\dagger(t, -T) J_\mu(\vec{x}, t) U(t, -T) | \beta \rangle$ は温度が均一なときの期待値で時間に依らない量なので略した。(3.4) は Gell-Mann Low の方法を用いると T-積に書くことができる。すなわち bra-vector を

$$\langle \beta | = \langle \beta | U(T, -T) / \langle \beta | U(T, -T) | \beta \rangle \quad (3.5)$$

とすると,

$$\langle J_\mu(x) \rangle = 2 \operatorname{Im} \{ \langle \beta | T \{ U(T, -T) J_\mu(x, t) \Gamma[\beta_a, -T] \} | \beta \rangle_c \} \quad (3.6)$$

となる。添字 c は連結部分をとることを意味する。

$U(T, -T)$ として (3.3) の解を用いると

$$\begin{aligned} \langle J_\mu(x) \rangle &= 2 \operatorname{Im} \left[\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i\lambda)^n}{n!} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \cdots \int_{-\infty}^{\infty} dt_n \right. \\ &\quad \left. \langle \beta | T \{ \mathcal{K}'(t_1) \cdots \mathcal{K}'(t_n) J_\mu(x, t) \Gamma[\beta_a, -T] \} | \beta \rangle_c \right] \end{aligned} \quad (3.7)$$

となり, $\langle J_\mu(x) \rangle$ を Feynman diagram を用いて計算することができる。ここで T は十分大きいものと仮定した。

4. Self consistent approximation

相互作用のあるボース粒子の系に対し前節で述べた方法を適用して $\langle J_\mu(x) \rangle$ を計算する。系の Hamiltonian として次のものにとる：

$$H = H_0 + \lambda H',$$

ここで,

$$H_0 = \int : \phi^\dagger(x, t) \left(-\frac{1}{2m} \Delta - \mu \right) \phi(x, t) : d^3x, \quad (4.1)$$

また相互作用 Hamiltonian として平行移動により不変な separable potential を仮定する。

$$H' = \frac{1}{2} \int d^3z d^3x_1 d^3x_2 d^3x_3 d^3x_4 u(x_1 - z) u(x_2 - z) u(z - x_3) u(z - x_4) : \phi^\dagger(x_1) \phi^\dagger(x_2) \phi(x_3) \phi(x_4) : \quad (4.2)$$

ここでは current として粒子の流れを考えることにする。すなわち

$$J_0(x, t) = : \phi_1^\dagger(x, t) \phi_1(x, t) : \\ J_l(x, t) = : \frac{1}{2mi} \left(\phi_1^\dagger(x, t) \frac{\partial \phi_1(x, t)}{\partial x_l} - \frac{\partial \phi_1^\dagger(x, t)}{\partial x_l} \phi_1(x, t) \right) : \quad (4.3) \\ (l=1, 2, 3)$$

をとる。 ϕ の添字は thermo field dynamics における第一成分をあらわしている。一体 Green 関数 $\Delta^{\alpha\beta}$, self energy $\Sigma^{\alpha\beta}$, polarization tensor $\Pi^{\alpha\beta}$ および補正された potential $V^{\alpha\beta}$ に対する Dyson 方程式は図 1 に示された近似をすると

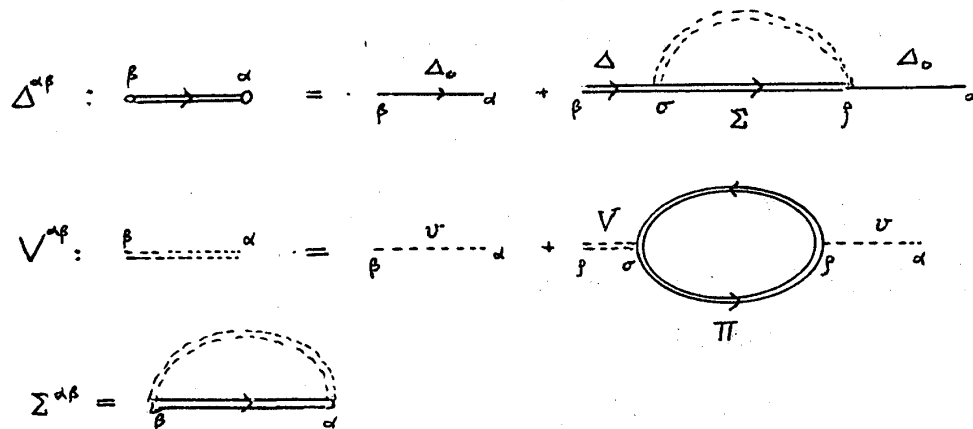


図 1 Δ , Σ , Π , V に対する Dyson 方程式。
 Δ_0 は自由場の Green 関数をあらわす。

次の式で与えられる。

$$\Delta^{\alpha\beta}(p) = \Delta_0^{\alpha\beta}(p) - \sum_{\rho, \sigma} \Delta_0^{\alpha\rho}(p) \Sigma^{\rho\sigma}(p) \Delta^{\sigma\beta}(p) \quad (4.4a)$$

$$V^{\alpha\beta}(p_1, p_2) = (\tau_3)_{\alpha\beta} u(p_1) u(p_2) - i \lambda \sum_{\rho, \sigma} (\tau_3)_{\alpha\rho} \Pi^{\rho\sigma}(k) V^{\sigma\beta}(p_1, p_2) \quad (4.4b)$$

$$\Pi^{\alpha\beta}(p) = -\frac{1}{(2\pi)^4} \int d^4q u^2\left(q + \frac{p}{2}\right) u^2\left(q - \frac{p}{2}\right) \Delta^{\alpha\beta}\left(q + \frac{p}{2}\right) \Delta^{\beta\alpha}\left(q - \frac{p}{2}\right) \quad (4.4c)$$

$$\Sigma^{\alpha\beta}(p) = -\frac{i\lambda}{(2\pi)^4} \int d^4q V^{\alpha\beta}(p, q) u(p) u(q) \Delta^{\alpha\beta}(q). \quad (4.4d)$$

この方程式の解を求めるために更に次の近似を行う。

$$\Pi^{\alpha\beta}(p) \approx \Pi^{\alpha\beta}(0) \quad (4.5)$$

$\Pi^{\alpha\beta}(0)$ は次のような簡単な行列になることが示される。

$$(\Pi^{\alpha\beta}(0)) = \kappa \begin{pmatrix} 1, & 1 \\ 1, & 1 \end{pmatrix} \quad (4.6)$$

ここで κ はある定数である。(4.5) の近似のもとで (4.4a) – (4.4b) を解くために self energy を Pauli 行列 τ_i ($i = 1, 2, 3$) と単位行列 τ_0 を用いて $\Sigma(p) = \sum_{k=0}^3 \sigma_k \tau_k$ とあらわすと、 σ_k は次の積分方程式にしたがうことが示される：

$$\begin{aligned} \sigma_k(p) &= \frac{\lambda^2 \kappa}{2(2\pi)^3} u^2(p) \int d^3q \frac{u^2(q) \sigma_k(q)}{\sqrt{\sigma_1^2(q) + \sigma_2^2(q) - \sigma_0^2(q)}}, \\ &\quad (k = 1, 2, 3) \\ \sigma_0(p) &= \frac{i\lambda}{2(2\pi)^3} u^2(p) \int d^3q \frac{u^2(q) \sigma_0(q)}{\sqrt{\sigma_1^2(q) + \sigma_2^2(q) - \sigma_0^2(q)}} \end{aligned} \quad (4.7)$$

この方程式の解は $\sigma_k(p) = i u^2(p) s_k$ ($k = 0, 1, 2, 3$) の形になることが直ちに分かる。 s_k は定数で次の式を満たす。

$$\sqrt{s_0^2 - s_1^2 - s_2^2} = \frac{\lambda^2 \kappa}{2(2\pi)^3} \int d^3q u^2(q) \equiv r \quad (4.8)$$

$$s_3 = \frac{i\lambda s_0}{2(2\pi)^3} \int d^3q u^2(q) \quad (4.9)$$

ここで $s_0^2 - s_1^2 - s_2^2 > 0$ であることを仮定した。また κ と s_k は次式により関係づけられる。

$$\kappa = \frac{s_1^2 + s_2^2}{4(2\pi)^3 r} \int d^3q u^2(q) \quad (4.10)$$

一体 Green 関数はこの近似では次の形になる。

$$\Delta(p) = \frac{W_+}{p_0 - \omega_p + \sigma_3(p) + i r u^2(p)} + \frac{W_-}{p_0 - \omega_p + \sigma_3(p) - i r u^2(p)} \quad (4.11)$$

ここで W_{\pm} は次式で与えられる定行列である。

$$W_+ = \frac{1}{2r} \begin{pmatrix} r + s_0, & -s_1 + i s_2 \\ -s_1 - i s_2, & -r + s_0 \end{pmatrix}, \quad W_- = -\frac{1}{2r} \begin{pmatrix} r - s_0, & s_1 - i s_2 \\ s_1 + i s_2, & -r - s_0 \end{pmatrix} \quad (4.12)$$

5. 熱拡散

前節で求めた Green 関数を用いて (4.3) で与えられる current の期待値を計算しよう。その期待値は 2 体 Green 関数

$$S_{\alpha\beta}(x, y) = \langle \beta | T \{ U(T, -T) \phi_{\alpha}(x) \phi_{\beta}(y) \Gamma[\beta_a, -T] \} | \beta \rangle \quad (5.1)$$

を用いて次のように表わせる。

$$\begin{aligned} \langle J_0(x, t) \rangle &= 2 \operatorname{Im} [S_{11}(x, x)] \\ \langle J_l(x, t) \rangle &= \lim_{y \rightarrow x} \left[2 \operatorname{Im} \left\{ \frac{1}{2mi} \left(\frac{\partial}{\partial x_l} - \frac{\partial}{\partial y_l} \right) S_{11}(x, y) \right\} \right] \\ &\quad (l = 1, 2, 3) \end{aligned} \quad (5.2)$$

あるいは $S_{\alpha\beta}(x, y)$ の Fourier 変換 $\hat{S}_{\alpha\beta}(p, k)$ を用いて

$$\langle J_l(x, t) \rangle = \frac{1}{[(2\pi)^4]^2} \int \frac{p_l}{m} \hat{S}_{11}(p, k) e^{ikx} d^4p d^4k \quad (5.3)$$

とあらわせる。

二体 Green 関数は BS 方程式を解くことにより得られる。BS 方程式に対し V を kernel とし、一体 Green 関数を補正された Δ とする ladder 近似を行う。 V と Δ は self consistent な条件 (4.4a) - (4.4d) を満すように定められる。(4.11) に示したように Δ は

$$\Delta(p) = \Delta_+(p) + \Delta_-(p)$$

のように retarded と advanced 項の和に書くことができる。self consistent に定めた Δ と V は図 2 に示した“直交”関係が成立つことに注意する。その結果 BS 方程式も図 3 に示されたように retarded と advanced に分離される。

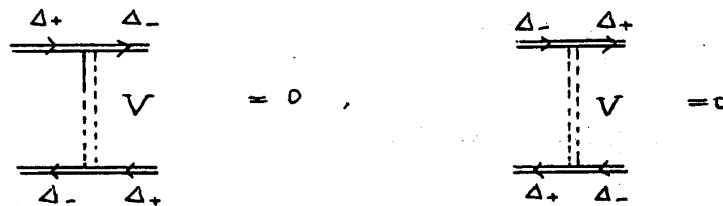


図 2 Green 関数の直交関係

Separable potential を用いた結果 BS 方程式の解は次の様な簡単な表式で表わせる。

$$\begin{aligned} \int dp_0 \hat{S}_{\alpha\beta}(p, k) &= -2\pi i \beta_a(k) e^{-ik_0 T} u\left(p + \frac{k}{2}\right) u\left(p - \frac{k}{2}\right) \\ &\quad \cdot [(\tau_3 W_+ \tau_2 W_- \tau_3) X_+(p, k) + (\tau_3 W_- \tau_2 W_+ \tau_3) X_-(p, k)] \end{aligned} \quad (5.4)$$

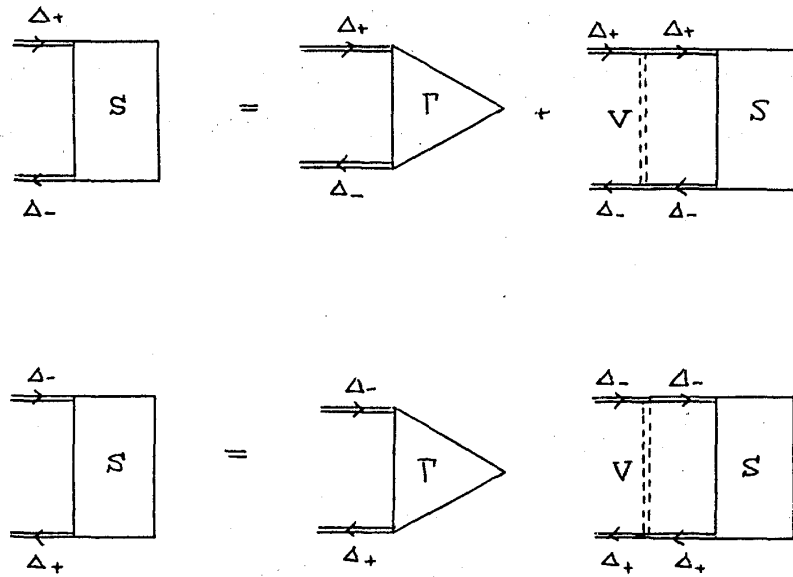


図3 2体 Green 関数に対する BS 方程式

ここで

$$X_I(p, k) = \frac{X_I^0(k)}{1 \mp \frac{i\lambda^2\kappa}{(2\pi)^3} \int d^3p \frac{u^2(p + \frac{k}{2}) u^2(p - \frac{k}{2})}{k_0 - \frac{p \cdot k}{m} \pm i\gamma \{u^2(p + \frac{k}{2}) + u^2(p - \frac{k}{2})\}}} \quad (5.5)$$

$$X_{\pm}^0(k) = \pm i \frac{\lambda^2\kappa}{(2\pi)^3} \int d^3p \frac{g(p) u(p + \frac{k}{2}) u(p - \frac{k}{2})}{k_0 - \frac{p \cdot k}{m} \pm i\gamma \{u^2(p + \frac{k}{2}) + u^2(p - \frac{k}{2})\}} \quad (5.6)$$

である。

(5.5) より γ が self consistency の条件 (4.8) を満たすとき $X_I(k)$ は $k \rightarrow 0$ で発散することが分かる。 $\int dp_0 S_{\alpha\beta}(p, k)$ は $k=0$ を特異点とするが、それは極ではなく cut である。

$\Pi^{\alpha\beta}$ に対し (4.5) の近似を行った結果 1 体 Green 関数が (4.11) で与えられ W_{\pm} は定行列となる。相互作用が十分弱いと仮定し我々の近似について検討しよう。このときは W_{\pm} は自由場のそれに十分近いと考えられるので

$$W_{\pm}(p) \approx \begin{pmatrix} c_p^2 & c_p d_p \\ c_p d_p & d_p^2 \end{pmatrix}, \quad W_{-}(p) \approx - \begin{pmatrix} d_p^2 & c_p d_p \\ c_p d_p & c_p^2 \end{pmatrix},$$

とあらわせる。ここで c_p, d_p は (2.3) の $\theta(p, \beta)$ を用いて $c_p = \cosh \theta(p, \beta)$, $d_p = \sinh \theta(p, \beta)$ で与えられる。 $|p| \ll \sqrt{\frac{2m}{\beta}} \equiv \Lambda_{\beta}$ なるときは W_{\pm} を定行列で近似することができる。自由場の Green 関数を用いて $V(p, q)$ を評価すると、BS 方程式の中間状態の積分は $|p| > \Lambda_{\beta}$ からの寄与が小さいこと

が示される。したがって図3に示されたBS方程式は自然な cut off Λ_β を含み、その cut off 内で我々の self consistent な解が有効であると考えられる。以上の考察から (5.5) にあらわれる積分は Λ_β で cut off されるものと考えてよく、その結果 $X_I(k)$ は拡散型の極を持ち k が十分小さいとき次式であらわせる。

$$X_+(k) = \frac{iA}{k_0 + iDk^2}, \quad X_-(k) = (X_+(k))^* \quad (5.7)$$

ここで

$$A = 2r \int d^3p g(p) / \int_{|q| < \Lambda_\beta} d^3p \quad (5.8)$$

$$D\delta_{ln} = \frac{r}{4} \cdot \frac{\int_{|q| < \Lambda_\beta} d^3p \left\{ \frac{\partial^2 W(q)}{\partial q_l \partial q_n} + \frac{2q_l q_n}{r^2 m^2} W^3(q) \right\} W(q)^{-2}}{\int_{|q| < \Lambda_\beta} d^3p} \quad (5.9)$$

ここで $W(q) = 1/u(q)^2$ である。

熱拡散流 $\langle J_\mu(x) \rangle$ は (5.4), (5.7) を (5.3) に代入することにより計算される。この式において k_0 積分を留数定理を用いて実行すると、 $t + T > 0$ なので、複素 k_0 面の下半面にある極のみが寄与する。その結果 $\langle J_\mu(x) \rangle$ は拡散方程式にしたがう。我々の Hamiltonian は時間反転に対し不変であり、二体 Green 関数 $\hat{S}_{11}(p, k)$ も retarded と advanced 項の和になるので T -不変な形をしている。 $\langle J_\mu(x) \rangle$ が時間反転に対し不変でない拡散型の方程式を満すのは $t + T > 0$ とすることにより時間の向きを過去から未来の方向に指定したからに他ならない。

通常、微視的な系から出発して巨視的量を求めるためには coarse graining の手続きを必要とする。我々の問題では温度 $\beta_a(x)$ が巨視的な尺度で変化するのでその Fourier 変換は小さい k の値に限られている。熱拡散型の特異点を導くために k は十分小さいと仮定したが、その仮定が coarse graining と考えることができる。

cut off 依存性など未解決の点もあるが、我々の計算は熱伝導や熱拡散の方程式を場の理論に基づく first principle から出発して導き出す可能性を示唆するものである。

参考文献

- 1) H. Ezawa, Progress in Quantum Field Theory, Ed. by H. Ezawa and S. Kamefuchi, Chap. 13, Elsevier Science Publishers B.V. 1986.
- 2) D. N. Zubarev, Nonequilibrium Statistical Thermodynamics Chap IV § 19.2. Plenum Publishing Corporation (1974).